TITLE:
シア流下における過冷却液体の相関関数(ソフトマターの物理学2003-普遍性と多様性-,研究会報告)

AUTHOR(S):
山本, 量一

CITATION:
山本, 量一. シア流下における過冷却液体の相関関数(ソフトマターの物理学2003-普遍性と多様性-,研究会報告). 物性研究 2003, 81(2): 180-181

ISSUE DATE:
2003-11-20

URL:
http://hdl.handle.net/2433/97697

RIGHT:

京都大学学術情報リポジトリ
KURENAI 紅
Kyoto University Research Information Repository

シア流下における過冷却液体の相関関数

京都大学大学院 理学研究科　山本 量一[1]

液体を急冷すると融点以下の過冷却状態でも液体相が安定に存在し、さらに温度を下げると液体的なアモルファス構造が凍結された固体、つまりガラスになる。ガラス転移と呼ばれるこの現象に関してはこれまでに膨大な研究がなされているが、未だにその本質的なメカニズムについては謎が多い。モード結合理論がガラスに応用されて以来、平衡に近い状態での線形応答に研究が集中した。しかし最近になり平衡から離れた状態での非線形応答に関心が集まりはじめている。数年前、我々は2次元と3次元のソフトコア粒子からなるモデル系について大規模なMDシミュレーションを行い、ある温度でシア流下（非平衡）にある系の性質は、それより高い温度でシアがない状態にマップできる可能性があることを報告した [1]。さらに、大きなシア速度を与えても粒子の拡散が驚くほど等方的なままであることを見出した [1]。この等方性についてより詳細に調べるため、本研究では小貫 [2] によって提案されている方法を用いて、シア流の下で系の中間散乱関数 $(F_s(\mathbf{k},t), F(\mathbf{k},t))$ を計算した。

図1(a)(b) に示したように、速度 $\dot{\gamma}$ のシア流により時間 t の間に位置ベクトル $\mathbf{r}$ は $\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}+\dot{\gamma}tr_y\mathbf{e}_x$ に移流する。同様に、フーリエ空間では波数ベクトル $\mathbf{k}$ は

$$\mathbf{k}(t) = \mathbf{k} - \dot{\gamma}tk_x\mathbf{e}_y \tag{1}$$

に移流する。したがって、シア流による移流の効果を排除した時間相関関数を次式で定義することが出来る。

$$C_{AB}(\mathbf{k},t) = \langle A_{\mathbf{k}(t)}(t)B^*_{\mathbf{k}}(0)\rangle \tag{2}$$

これを用いれば、中間散乱関数の incoherent と coherent 部分はそれぞれ次式で与えられる。

$$Fs(\mathbf{k},t) = \frac{1}{N}\left\langle \sum_{i=1}^{N} e^{[-i\{\mathbf{k}(t)\cdot\mathbf{r}_i(t)-\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i(0)\}]}\right\rangle \tag{3}$$

$$F(\mathbf{k},t) = \frac{1}{N}\left\langle \sum_{i=1}^{N} e^{[-i\mathbf{k}(t)\cdot\mathbf{r}_i(t)]}\sum_{j=1}^{N} e^{[i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j(0)]}\right\rangle \tag{4}$$

図1(d) に示すように、$|\mathbf{k}| \simeq \frac{2\pi}{\sigma_1}$ の条件の下、波数ベクトルを異なる4つの方向にとり、シア流下にある2次元系の中間散乱関数 $Fs_1(\mathbf{k},t)$ and $F_{11}(\mathbf{k},t)$ を計算した（添字1は大小2成分系の小さい粒子の意）。$T = 0.526$（過冷却状態）での結果を図2に示す。その結果、i) $Fs_1(\mathbf{k},t)$ と $F_{11}(\mathbf{k},t)$ がよく似た挙動を示すこと、ii) シア流が粒子のダイナミクスを促進すること、iii) 速いシア流の下でも粒子のダイナミクスがほとんど等方的であること、を確認した。中でもダイナミクスの等方性は極めて重要な意味を持つ。最近モード結合理論を用いて同様の結果が得られている [3]。

[1] E-mail: ryoichi@scphys.kyoto-u.ac.jp

謝辞

ハーバード大学化学・化学生物学教室の宮崎州正さん、D.R. Reichman 教授の協力に感謝します。

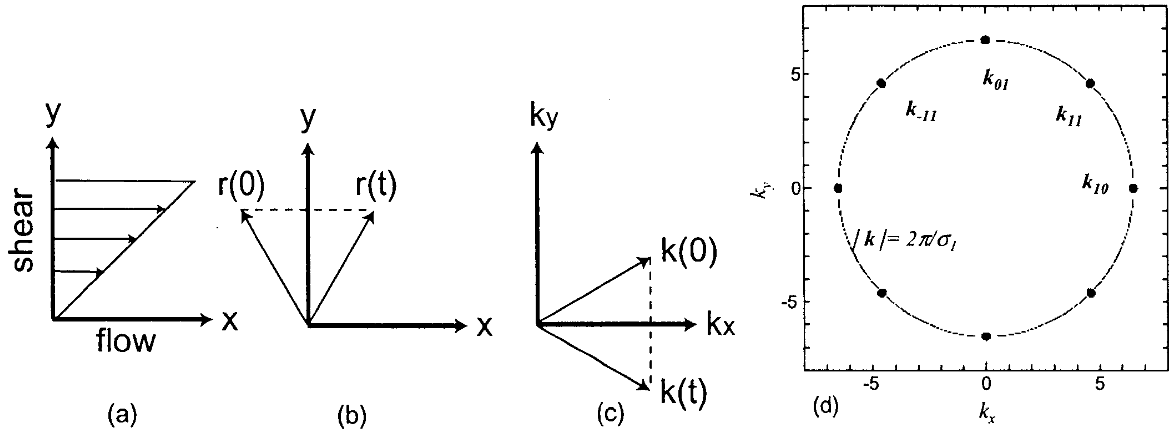

図 1: (a) Geometry of shear flow. (b) Shear advection in real space. (c) Shear advection in Fourier space. (d) Sampled wave vectors (t=0).

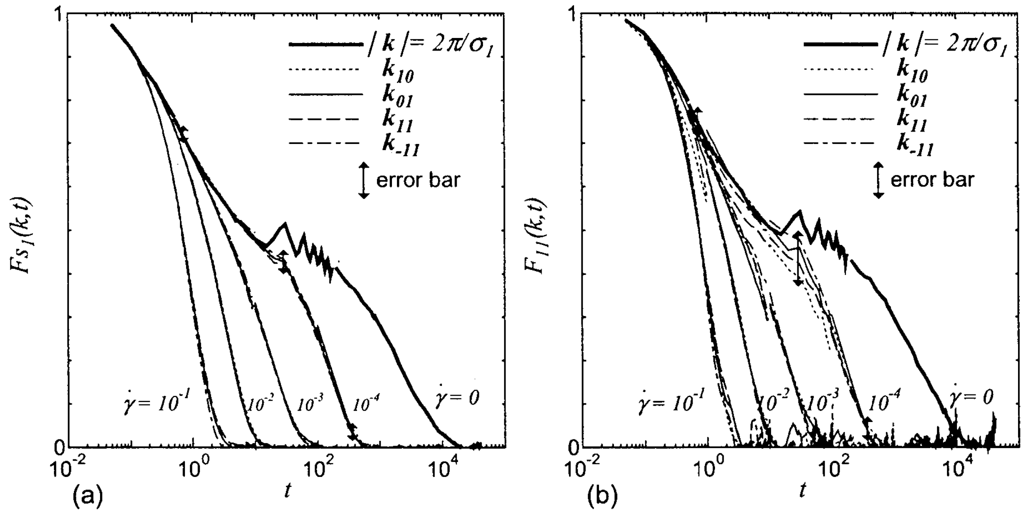

図 2: Intermediate scattering functions under shear; (a) incoherent part and (b) coherent part.

参考文献

[1] R. Yamamoto and A. Onuki, Phys. Rev. E **58**, 3515 (1998); J. Chem. Phys. **117**, 2359 (2002).

[2] A. Onuki and K. Kawasaki, Ann. Phys. (N.Y.) **121**, 456 (1979); A. Onuki, J. Phys.: Condens. Matter **9**, 6119 (1997).

[3] K. Miyazaki and D.R. Reichman, Phys. Rev. E **66**, 050501 (2002).